2成分Soliton系の統計力学(物性におけるソリトンの統計力学とダイナミックス,科研費研究会報告)

宮下, 崇; 佐々木, 一夫; 都築, 俊夫

2成分Soliton系の統計力学

東北大・理　宮下 崇，佐々木一夫，都築俊夫

Hamiltonian density [1),2)]

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}|\Psi_t|^2 + \frac{1}{2}|\Psi_x|^2 + V(|\Psi|,\phi) \quad , \quad \Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|\, e^{i\phi(x,t)}$$

$$V(|\Psi|,\phi) = \frac{1}{4}(1-|\Psi|^2)^2 + \frac{1}{4}\kappa|\Psi|^2\sin^2\phi \quad , \quad \kappa > 0 : \text{parameter}$$

によって記述される系の非線形励起の古典統計力学への効果をTransfer Integral法を用いて．低温展開の意味で厳密に．すべての κ について解析的に求めた。その結果．$\kappa=1$ で生ずる系の異常ゆらぎが比熱．相関関数などに影響を及ぼすことがわかった。

このModelは．$\kappa \to 0+$ の極限でSine-Gordon modelに．また $\kappa \to \infty$ の極限で ϕ^4 modelに帰着し．$\kappa=1$ で両modelの性質がCrossoverするという特徴をもつ。

$V(|\Psi|,\phi)$ は $\Psi(x,t)=\pm 1$ に2つの縮退したminimumを持つので．$\Psi(x,t)=\xi(x,t)+i\,\eta(x,t)$ と書いて．V のminimumをつなぐKink解を求めると．解析的に．次の3 Classが存在することがわかり．生成エネルギー，線形安定性も議論できる。[1),2)]

Class	1	2	3
Kink解 $S=\gamma(x-vt)$ $\gamma=(1-v^2)^{-\frac{1}{2}}$	$\xi_1(S)=\mathrm{th}\frac{1}{\sqrt{2}}S$ $\eta_1(S)=0$	$\xi_2(S)=\mathrm{th}\sqrt{\frac{\kappa}{2}}S$ $\eta_2(S)=\sqrt{1-\kappa}\ \mathrm{sech}\sqrt{\frac{\kappa}{2}}S$	$\xi_3(S)=1-\frac{3}{2}\mathrm{sech}^2\frac{S}{2\sqrt{2}}$ $\eta_3(S)=\frac{3}{2}\mathrm{sech}\frac{S}{2\sqrt{2}}\cdot\mathrm{th}\frac{S}{2\sqrt{2}}$ for $\kappa=\frac{1}{4}$
存在領域	all $\kappa>0$	$0<\kappa<1$	$0<\kappa<1$
軌跡	$\eta=0$ ，$-1\le\xi\le1$：直線	$\xi^2+\frac{\eta^2}{1-\kappa}=1$：半楕円	$(\xi+\frac{1}{4})^2+\eta^2=(\frac{3}{4})^2$：円 for $\kappa=\frac{1}{4}$
生成エネルギー	$E_1(v)=\gamma\cdot\frac{2\sqrt{2}}{3}$	$E_2(v)=\gamma\cdot\sqrt{2\kappa}\,(1-\frac{1}{3}\kappa)$	$E_3(v)=\gamma\cdot\frac{9}{8}\sqrt{2}$ for $\kappa=\frac{1}{4}$
線形安定性	$\kappa>1$ で安定．$0<\kappa<1$ で不安定 （η 方向の内部振動modeの振動数 $\omega_1=\sqrt{\frac{\kappa-1}{2}}$ ）	$0<\kappa<1$ で安定	不安定
特徴	ϕ^4 型 Topological Kink $\kappa=1$ でゆらぎのmodeの1つがsoft化する（異常ゆらぎ）	Sine-Gordon型 Topological Kink	Non-topological Kink $\kappa\neq\frac{1}{4}$ では数値的に求まる。 $E_3(v)=E_1(v)+E_2(v)$

$\kappa>1$ ではClass 1 Kinkが安定に存在するのに対し．$0<\kappa<1$ ではClass 1 Kinkは不安定でその代わりにClass 2 Kinkが出現し．安定に存在する。この意味で $\kappa=1$ をBifurcation Pointと呼ぶことにする。[1),2)]

また．$\kappa=1$ でClass 1 Kink．Class 2 Kinkの生成エネルギーは滑らかにつながる。

この系の古典統計力学をTransfer Integral法を用いて調べると、連続体近似のもとで次の2次元Schrödinger-like固有値方程式を得る。[1),2)]

$$\left\{-\frac{1}{2\tilde{m}}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)+\tilde{V}(\xi,\eta)\right\}\Phi_n(\xi,\eta)=\tilde{\varepsilon}_n\,\Phi_n(\xi,\eta)$$

$$\tilde{V}(\xi,\eta)=\left\{1-(\xi^2+\eta^2)\right\}^2+\kappa\eta^2\quad,\quad \tilde{m}=\frac{1}{4}\beta^2\quad.\quad \beta=\frac{1}{T}$$

この固有値方程式の基底状態の固有値：$\tilde{\varepsilon}_0$、第1励起状態の固有値：$\tilde{\varepsilon}_1$ を用いると、系の熱力学諸関数、静的相関関数が求まる。（単位系を適当に選んで無次元化してある。）

我々は、上記の固有値方程式を変数分離し[1),2)] 低温条件（$\sqrt{\tilde{m}}\gg 1$）のもとで求める固有値 $\tilde{\varepsilon}_0$, $\tilde{\varepsilon}_1$ を、

$\tilde{\varepsilon}_0=\tilde{\varepsilon}_0^{(0)}-t_0$　　$\tilde{\varepsilon}_0^{(0)}$：展開parameter $\frac{1}{\sqrt{\tilde{m}}}\sim T$ のみでべき展開可能な部分（Phonon部分）

$\tilde{\varepsilon}_1=\tilde{\varepsilon}_0^{(0)}+t_1$　　t_0, t_1：$\tilde{\varepsilon}_0^{(0)}$ 以外の指数関数的に小さい部分（Kink部分）

とに分けて、1成分Soliton系の場合と同様に、Modified W.K.B.法[5)]、Green関数法[6)]を用いて、$\tilde{\varepsilon}_0$, $\tilde{\varepsilon}_1$ の低温における漸近形を求め、次の結果を得た。

(1) Free energy density：$F=F_P+F_K$

$$F_P=\frac{2}{\beta l}\ln\frac{\beta\hbar}{l}+\frac{1}{4}\tilde{\varepsilon}_0^{(0)}\quad,\quad \tilde{\varepsilon}_0^{(0)}=2\left(\sqrt{2}+\sqrt{\frac{\kappa}{2}}\right)\left(\frac{1}{\beta}\right)-\frac{2+\sqrt{\kappa}}{1+\sqrt{\kappa}}\cdot\left(\frac{1}{\beta}\right)^2+O\left(\left(\frac{1}{\beta}\right)^3\right)$$ ：Phonon部分

l：lattice parameter　　$\hbar$：無次元化したPlanck const.

$$F_K=-\frac{1}{4}t_0$$ ：Kink部分

(A) $0<\kappa<1$, $(1-\kappa)^2\beta\gg 1$

$$t_0=\frac{8}{\sqrt{\kappa}}\left[\frac{2}{3}\cdot\frac{\kappa^2(1+\sqrt{\kappa})^3(3-\kappa)}{1-\sqrt{\kappa}}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\beta E_2(0)\right]^{-\frac{1}{2}}e^{-[\beta E_2(0)]}\left[1-\frac{(8\kappa^2+16\kappa\sqrt{\kappa}-37\kappa+7)(3-\kappa)}{24(1-\kappa)^2}\left[\beta E_2(0)\right]^{-1}+O\left(\left[\beta E_2(0)\right]^{-2}\right)\right]$$

$E_2(0)=\sqrt{2\kappa}\left(1-\frac{1}{3}\kappa\right)$ ：$0<\kappa<1$ で安定に存在するClass 2 Kinkの静止生成エネルギー

(B) $\kappa=1$ ：Bifurcation point

$$t_0=16\left(\frac{2}{3}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)\left[\beta E_{1,2}(0)\right]^{-\frac{1}{4}}e^{-[\beta E_{1,2}(0)]}\left[1-\frac{4}{\sqrt{3}}\pi\cdot\frac{1}{\{\Gamma(\frac{1}{4})\}^2}\left[\beta E_{1,2}(0)\right]^{-\frac{1}{2}}+O\left(\left[\beta E_{1,2}(0)\right]^{-1}\right)\right]$$

$E_{1,2}(0)=\frac{2\sqrt{2}}{3}$ ：$\kappa=1$ で縮退するClass 1,2 Kinkの静止生成エネルギー

(C) $\kappa>1$, $(\kappa-1)^2\beta\gg 1$

$$t_0=\frac{16}{\sqrt{\kappa}}\left[\frac{2}{3}\,\frac{\sqrt{\kappa}+1}{\sqrt{\kappa}-1}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\beta E_1(0)\right]^{-\frac{1}{2}}e^{-[\beta E_1(0)]}\left[1-\frac{71\kappa^2+60\kappa\sqrt{\kappa}-130\kappa-84\sqrt{\kappa}+119}{72(\kappa-1)^2}\left[\beta E_1(0)\right]^{-1}+O\left(\left[\beta E_1(0)\right]^{-2}\right)\right]$$

$E_1(0)=\frac{2\sqrt{2}}{3}$ ：$\kappa>1$ で安定に存在するClass 1 Kinkの静止生成エネルギー

(2) ξ-ξ Correlation length：λ

$$\lambda=\frac{4}{\beta(\tilde{\varepsilon}_1-\tilde{\varepsilon}_0)}=\frac{4}{\beta(t_1+t_0)}$$

今の計算精度では $t_1=t_0$。即ち、$\tilde{\varepsilon}_0$, $\tilde{\varepsilon}_1$ は $\tilde{\varepsilon}_0^{(0)}$ を中心として対称に分離する。

F_Kの表式で $\kappa \to 0+$, but $\beta\sqrt{2\kappa} \gg 1$ とするとSine-Gordon modelの，また，$\kappa \to \infty$ とすると，ϕ^4 modelの結果と一致することがわかる。[6] 自由エネルギー密度の表式からすぐに比熱が求まる。

主な結論をまとめると，

① この系の低温における古典統計力学には，Phonon と Topological Kink が効き，Trullinger, et al [1),2),3)] が主張するような，未知の Non-topological Kink の効果は存在しないことがわかる。この結果は，1成分Soliton系の理論[4)]の自然な拡張であり，物理的にも理解し易い。

② F_Kの表式の主要項の温度依存性をみると，$\kappa \neq 1$ では，$F_K \sim \beta^{-\frac{1}{2}} e^{-\beta E(0)}$ で，1成分Soliton系の結果[4)]と同じ温度依存性を示すのに対し，$\kappa = 1$ なる Bifurcation point では，$F_K \sim \beta^{-\frac{1}{4}} e^{-\beta E(0)}$ と，prefactorのべキが変化していることが注目される。

これは，$\kappa = 1$ で Kinkのまわりのゆらぎの mode の1つが soft化していることを反映していると解釈される。

即ち，Kink Gas Phenomenologyの立場[4)]で考えると，

$$F_K \sim \beta^{-\frac{1}{2}} e^{-\beta E(0)} = \beta^{-\frac{3}{2}} e^{-\beta(E(0)+\Sigma)}, \quad \Sigma = -\frac{\ln\beta}{\beta} \qquad \text{for} \quad \kappa \neq 1$$

$$F_K \sim \beta^{-\frac{1}{4}} e^{-\beta E(0)} = \beta^{-\frac{3}{2}} e^{-\beta(E(0)+\Sigma^*)}, \quad \Sigma^* = -\frac{5}{4}\frac{\ln\beta}{\beta} \qquad \text{for} \quad \kappa = 1$$

$E(0)+\Sigma$, $E(0)+\Sigma^*$ ： Kinkの有効生成エネルギー

Σ, Σ^* ：熱的くりこみによる Kinkの自己エネルギー

とかけ，$\kappa = 1$ では，ゆらぎが異常に大きくなるために，Kinkの有効生成エネルギーが小さくなった($0 > \Sigma > \Sigma^*$) と理解される。

③ 1成分Soliton系の理論[6)]と同様に，Kink励起に起因する Schottky型の異常比熱がこの系でも存在する。

さらに $\kappa = 1$ では異常ゆらぎのために異常比熱がさらに拡大される。

References

1) S.E. Trullinger and R.M. DeLeonardis, Phys. Rev. B22 (1980), 5522

2) K.R. Subbaswamy and S.E. Trullinger, Physica 2D (1981), 379

3) S. Ohta and K. Nakamura, J. Phys. C 14 (1981), L427

4) J.F. Currie et. al., Phys. Rev. B22 (1980), 477

5) K. Sasaki, to appear in Prog. Theor. Phys. 67 #2 (1982)

6) K. Sasaki and T. Tsuzuki, to appear in Solid State Commun.